

UNIVERZA V LJUBLJANI  
FAKULTETA ZA MATEMATIKO IN FIZIKO  
ODDELEK ZA FIZIKO

VIŠJE RAČUNSKE METODE

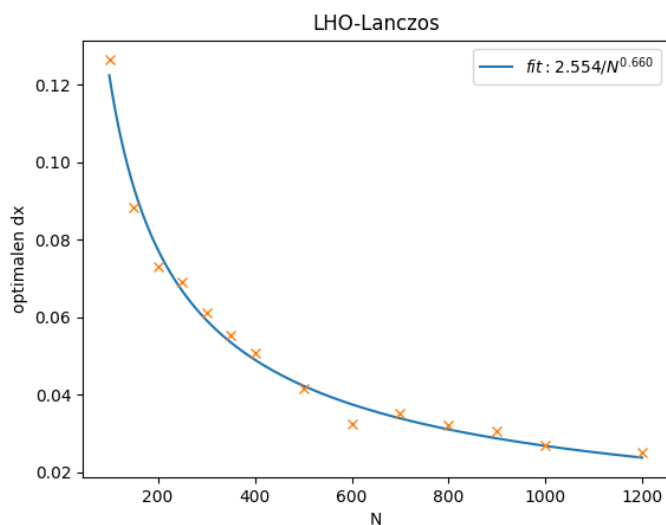
**2. naloga: Stacionarni problem in spektralne metode**

Žiga Šinigoj, 28222025

Ljubljana, februar 2023

# 1 Rezultati

V nalogi nas zanima energijski spekter anharmonskega oscilatorja. Implementiral sem dve metodi in sicer obravnavo anharmonskega člena v perturbativno, torej v lastni bazi anharmonskega oscilatorja in Lanczosevo metodo. Pri implementaciji prve metode sem pričakovano vrednost perturbativnega člena računal preko vsote, kjer sem diskretiziral krajevni interval. Lahko bi računal natančneje z numerično integracijo, a bi bil problem časovno potratnejši. Za to nalogo bi bilo dobro če bi uporabil kakšen hitrejši programski jezik npr. C++, saj je Python precej počasen in nisem mogel izračunati večji del energijskega spektra. Pri implementaciji Lanczoseve metode lahko uporabim Hamiltonian iz prejšnje naloge do 7. reda (7 diagonalna oblika). Metodo lahko preverim na izračunu lastnih energij harmonskega oscilatorja  $E_n = (n + 1/2)$ . Število točnih lastnih vrednosti ni odvisno samo od velikosti baze  $N$ , ampak tudi od  $h$  (zrnatosti intervala). Če je  $h$  prejemajhen dobim veliko degeneracij energijskih nivojev, prevelik  $h$  pa lahko povzroči težave pri določanju višjih energij spektra, saj izgubljam na ločljivosti. Očitno obstaja nek optimalen  $h$ , ki sem ga poiskal tako, da sem pogledal pri katerem  $h$  je največje število ujemanj lastnih energij harmonskega oscilatorja z natančnostjo  $\epsilon = 10^{-3}$ . To prikazuje slika 1.



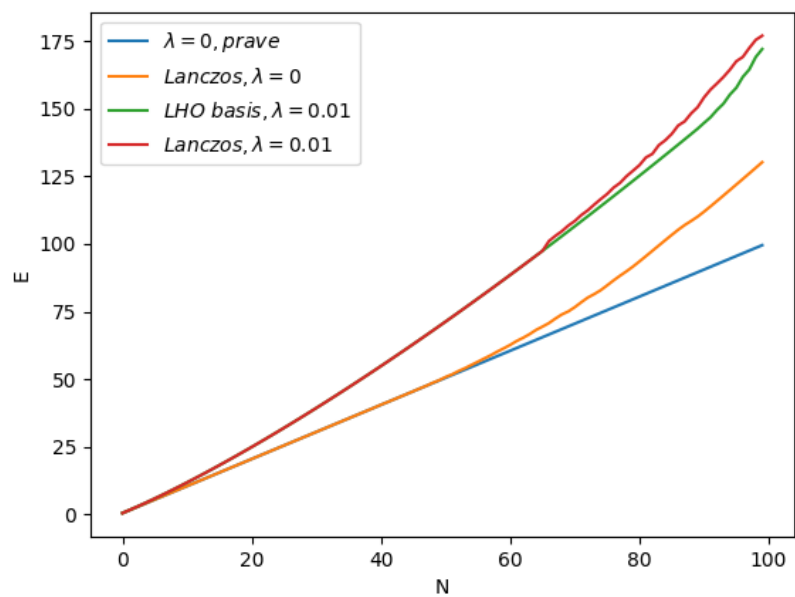
(a)

Slika 1: Optimalna zrnatost krajevnega intervala ( $h = dx$ ) v odvisnosti od velikosti baze ( $N$ ).

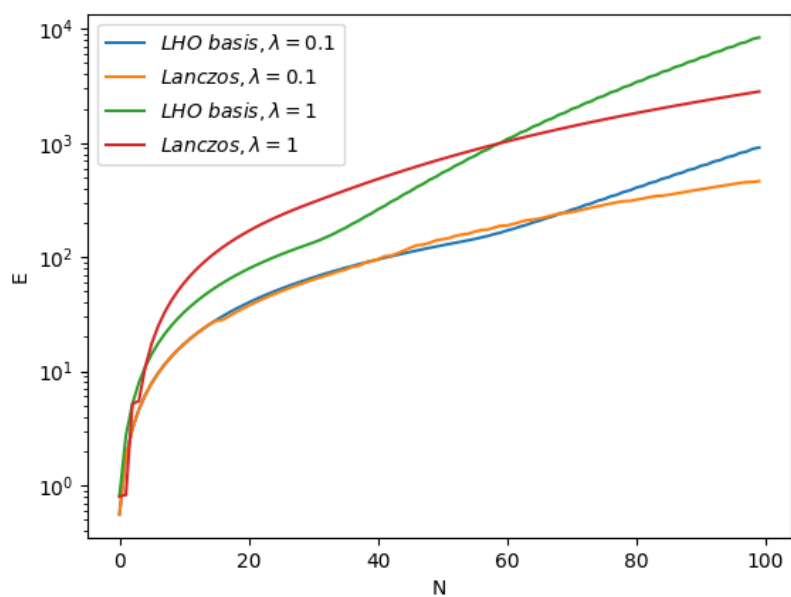
## 1.1 Energijski spekter anharmonskega oscilatorja

Energijski spekter prikazuje slika 2. Lanczoseva metoda precej dobro opiše prvih 50 najnižjih energij harmonskega oscilatorja. Tudi pri anharmonskem oscilatorju se metodi precej dobro ujemata za majhne  $\lambda$ . Pri velikih  $\lambda$  pa se pojavijo velika odstopanja. Vseeno bi prej zaupal izračunu z Lanczosevo metodo, saj je perturbativni račun z harmonsko bazo veljaven samo za majhne  $\lambda$ .

Poskusil sem tudi oceniti število skonvergiranih lastnih vrednosti na semiklasični način. To sem naredil tako, da sem numerično poiskal radije anharmonske nivojnice, ki imajo površino  $2\pi$ . Potem sem pogledal največji anharmonski radij, ki je še manjši od harmonskega radija nivojnice in potem numerično primerjal ploščini, da sem dobil delež skonvergiranih lastnih vrednosti  $r$ . To prikazuje slika 3. Z večanjem motnje se nivojnice ožajo in delež postaja vse manjši.

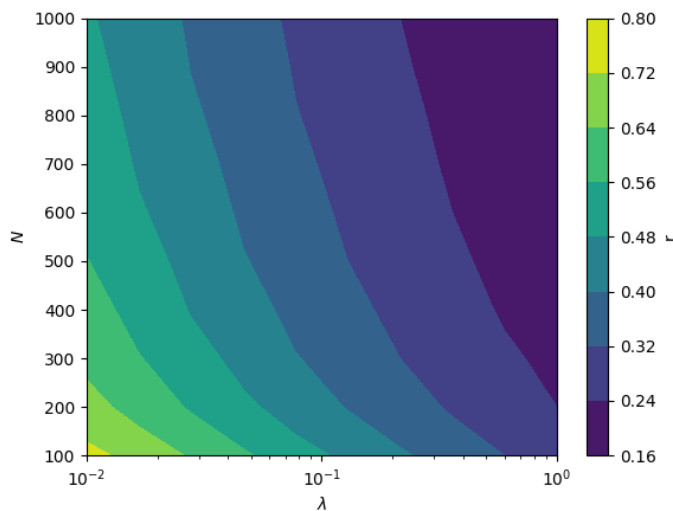


(a)



(b)

Slika 2: Energijski spekter harmonskega in anharmonskega oscilatorja. Velikost baze Lanczoseve metode: 1000, velikost baze harmonskega oscilatorja:150 .



(a)

Slika 3: Semiklasična ocena deleža skonvergiranih lastnih energij v odvisnosti od velikosti baze in parametra  $\lambda$ .

## 1.2 Časovni razvoj

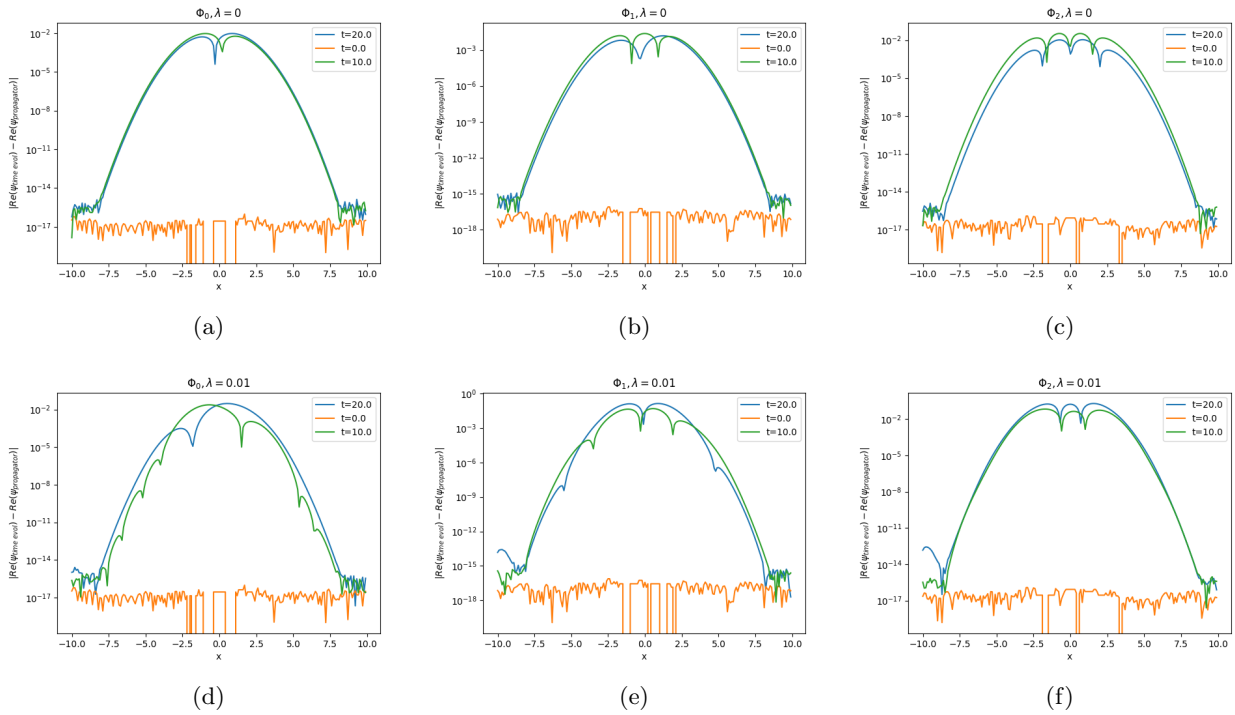
Ker časovni potek že poznam iz prejšnje naloge sem se odločil pogledati samo odstopanja. Primerjal sem odstopanje med neposrednim časovnim razvojem iz 1.naloge in perturbativnim računom. Poskusil sem primerjati tudi odstopanja časovnega razvoja od Lanczoseve metode, ki tudi dobro opiše časovni razvoj. Pri primerjanju sem imel nekaj težav z normalizacijo, zato ne dobim tako lepih grafov. Težava je, da časovni razvoj ne potrebuje tako velike krajevne diskretizacije (z večjo diskreditacijo postane zelo počasen), kot jo potrebuje Lanczoseva metoda za izračun matričnih elementov. Faza valovnih funkcij se ujema, pri amplitudi pa imam očitno nekje neko napako, ki je nisem uspel najti. Pri perturbativnem računu sem vzel prvih 100 lastnih energij in funkcij. Odstopanja prikazuje slika 4. Ujemanje je dobro za majhne  $\lambda$ . Pri večjih vrednostih pa so odstopanja zelo velika, mogoče bi za večje vrednosti motnje moral vzeti manjše število lastnih funkcij (npr.50).

## 1.3 Konvergenca lastnih energij

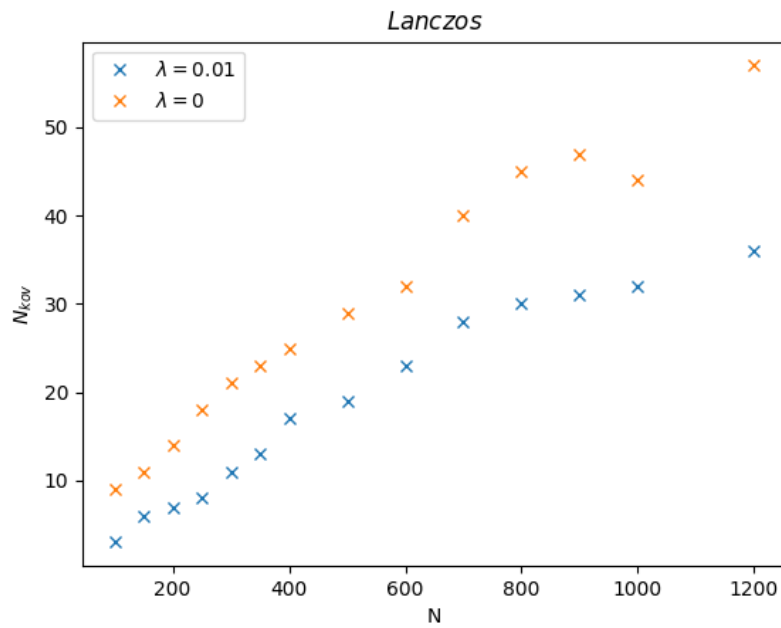
Konvergenco lastnih energij Lanczoseve metode v odvisnosti od velikosti sem za harmonski oscilator določil glede na prave vrednosti energij z natančnostjo  $\epsilon$ . Za anharmonski oscilator pa nimam analitičnih rešitev, zato sem vzel za referenčno vrednost spekter energij, ki sem ga dobil z Lanczosevo metodo pri velikosti baze  $N = 2000$ . Za harmonski oscilator skonvergira približno 80 najnižjih energij (pri  $N = 2000$ ). Število skonvergiranih lastnih energij prikazuje slika 5. Konvergenca je manjša ko vklopim anharmonsko motnjo.

## 1.4 Zaključek

Najnižja stanja anharmonskega oscilatorja lahko precej natančno opišem z obema metodama. Pri večji vrednosti  $\lambda$  pa je boljša Lanczoseva metoda. Naloga je zahtevala precej računanja, zato bi bilo bolj smiselno za resne namene uporabiti kakšen hitrejši programski jezik.



Slika 4: Odstopanja med neposrednim časovnim razvojem in perturbativnim računom lastnih funkcij LHO pri različnih časih in vrednostih parametra  $\lambda$ .



(a)

Slika 5: Število skonvergiranih lastnih energij  $N_{kon}$  v odvisnosti od velikosti baze  $N$ .